

УДК 537.226.4:004.8

ЭЛЕМЕНТЫ ТЕОРИИ СЕГНЕТОЭЛЕКТРИЧЕСКИХ СВОЙСТВ МИКРОТРУБОЧКИ ЦИТОСКЕЛЕТА НЕЙРОНА

Е. Е. Слядников

Томский научный центр СО РАН
Томский политехнический университет
E-mail: opi@hq.tsc.ru

Сформулирована и исследована физическая модель конфигурационных степеней свободы микротрубочки цитоскелета как системы взаимодействующих диполей. Показано, что наличие фрустрированных связей – важная особенность неупорядоченной дипольной системы микротрубочки цитоскелета. Построена фазовая диаграмма сегнетоэлектрического состояния микротрубочки цитоскелета при 0 К. Показано, что основное состояние дипольной системы микротрубочки цитоскелета является дипольным стеклом или слабым ферромагнетиком. Вычислены среднеквадратический дипольный момент и корреляционная длина дипольной цепи микротрубочки.

Ключевые слова:

Модель конфигурационных степеней свободы, микротрубочка цитоскелета, среднеквадратический дипольный момент и корреляционная длина дипольной цепи.

1. Введение

В последние годы наблюдается значительный интерес к гипотезе квантово-статистической природы человеческого сознания [1]. Одним из возможных вариантов этой гипотезы является предположение, что сознание – это процесс, протекающий в квантово-статистической подсистеме мозга, которая, благодаря своей квантово-статистической природе, способна чрезвычайно эффективно обрабатывать сенсорную и иную информацию, осуществлять сложные логические операции и т. п. Есть экспериментальные свидетельства, что в нейронах мозга подходящими субстратами для «квантово-статистических вычислений», являются информационные белковые нанополимеры – микротрубочки цитоскелета [2].

Базовыми элементами структуры цитоскелета являются микротрубочки цитоскелета, которые представляют собой полые цилиндрические трубки с внешним диаметром 25 нм и внутренним – около 14 нм, длиной 1...10 мкм, иногда организованные в более крупные трубкообразные волокна [1, 2]. Каждая микротрубочка представляет собой белковый полимер, состоящий из субъединиц, называемых тубулинами. Каждая молекула тубулина, в свою очередь, представляет собой димер, то есть состоит из двух соединенных тонкой перемычкой частей, называемых α -тубулином и β -тубулином. Эти пары глобулярных белков, напоминающих по форме орех арахиса, связаны между собой в полимерную цепочку, свернутую в спираль-микротрубочку. Обычно на каждую микротрубочку приходится по 13 рядов димеров тубулина. Размеры димера составляют приблизительно $8 \times 4 \times 4$ нм, а его молекулярный вес около 110 килодальтонов [1, 2]. Димер тубулина может существовать в двух (по крайней мере) различных геометрических конфигурациях, называемых конформациями. Конформации эти обусловлены тем, что в центре димера (в его «безводной части») имеется электрон, который может занимать одно из двух возможных положений.

В экспериментальных исследованиях (см., например, [1, 3]), выполненных при физиологической температуре и посвященных поискам пьезоэлектрических эффектов в живых системах, было обнаружено, что микротрубочка цитоскелета обладает дипольным моментом. Массивы микротрубочек цитоскелета обнаруживают сегнетоэлектрические свойства, ориентируются под действием как внешнего, так и внутриклеточного электрического поля. Каждая молекула тубулина, из которой построены микротрубочки цитоскелета, обладает дипольным моментом величиной около 100 дебай. Микротрубочки цитоскелета оптически мерцают при метаболической активности, а приблизительные резонансные частоты молекул тубулина, составляют $10^{11} \dots 10^{13}$ Гц [1, 4, 5, 6]. Обнаружены солитонные возбуждения в белковых нанополимерах, вызванные когерентным электромагнитным излучением [7]. Все эти экспериментально полученные результаты требуют объяснения с точки зрения теории сегнетоэлектричества.

Одна из первых теоретических моделей описания сегнетоэлектрических свойств микротрубочек цитоскелета была предложена в работе [8]. Эта двумерная модель системы взаимодействующих диполей основывалась на приближении эффективного поля и в континуальном приближении привела к решению в виде сегнетоэлектрической доменной стенки. Затем для этой системы диполей была сформулирована классическая двумерная модель Изинга, с помощью которой исследован сегнетоэлектрический переход, рассчитаны критическая температура, электронная поляризация микротрубочки цитоскелета как функция температуры [4].

Однако микротрубочки цитоскелета являются существенно низкоразмерными наноструктурами, которые представляют собой полимерные цепочки свернутые в спирали [1, 2]. Известно, что в низкоразмерных системах не существует ярко выраженного фазового перехода, критической температу-

ры, флуктуации размывают дальний порядок, следовательно, такие системы должны описываться с помощью флуктуационных теорий [9]. Поэтому для описания сегнетоэлектрических свойств микротрубочек цитоскелета нужно формулировать новые низкоразмерные модели информационных белковых нанополимеров, учитывающие флуктуации поляризации молекул тубулина и возбуждение конфигурационных степеней свободы [10, 11].

2. Модель конфигурационных степеней свободы микротрубочки цитоскелета

Рассмотрим конфигурационные степени свободы информационного белкового нанополимера – микротрубочки цитоскелета, которые ответственны за сегнетоэлектрические свойства этой системы. Каждая молекула тубулина (димер) обладает дипольным моментом, и на состояние поляризации димера влияют состояния поляризации ближайших соседей (вследствие слабых ван-дер-ваальсовых связей между ними, которые вызывают взаимную ориентацию дипольных моментов молекул тубулина) (рис. 1). То есть существуют вполне конкретные правила, определяющие конфигурацию каждого димера через конфигурации его соседей: если коэффициент связи положителен, то диполи имеют ферромагнитную ориентацию, если коэффициент связи отрицателен – антиферромагнитную ориентацию, если коэффициент связи случайная величина – неупорядоченную ориентацию (дипольное стекло).

Поскольку тубулины – это молекулы-димеры, существующие в двух пространственных конфигурациях, то электрон молекулы тубулина, ответственный за «переключение» между конфигурациями, находится в симметричном потенциале, который имеет два локальных минимума. Левая яма соответствует исходному состоянию молекулы (α -состоянию тубулина), а правая яма – конечному состоянию молекулы (β -состоянию тубулина).

Для простоты вычислений будем считать, что минимумы исходного и конечного состояний молекулы тубулина лежат на одной оси.

Для характерного двухяменного профиля потенциальной энергии, переходы электрона через барьер, разделяющий минимумы потенциальной энергии, при конечной температуре происходят с частотой, в которую дают вклад как туннельная, так и активационная составляющие:

$$\omega = A \exp(-\varepsilon / k_B T) + B \exp(-2l\sqrt{2m\varepsilon} / \hbar),$$

где B – множитель порядка частоты столкновения с барьером туннелирующей частицы. Величина ε должна быть как раз порядка высоты барьера, отсчитанного от нижнего энергетического уровня (от энергии основного состояния электрона). Для проведения оценки величины ε можно просто указать ее область изменения $0 < \varepsilon < \varepsilon_a$. Если считать, что $\varepsilon_a \sim 4$ эВ, то есть порядка характерной энергии отрыва электрона от молекулы тубулина, а тепловая энергия частицы $k_B T_n = 0,03$ эВ для $T_n = 300$ К, то вероятность набрать энергию 4 эВ за счет тепловых флуктуаций при комнатной температуре крайне мала, порядка e^{-100} . В этом случае переход электрона из одной потенциальной ямы в другую в молекуле тубулина даже при комнатных температурах носит туннельный характер и систему конфигурационных возбуждений в микротрубочке цитоскелета необходимо описывать как квантовую двухуровневую систему [10].

Когда $\varepsilon_a \sim 0,03$ эВ, то есть порядка тепловой энергии частицы при комнатной температуре, переход электрона из одной потенциальной ямы в другую в молекуле тубулина имеет тепловой флуктуационный характер и систему конфигурационных возбуждений в микротрубочке цитоскелета можно описывать как классическую систему из N классических псевдоспинов $1/2$ (дипольных моментов), каждый из которых может находиться всего в одном из двух состояний $S_i^z = +1$, $S_i^z = -1$.

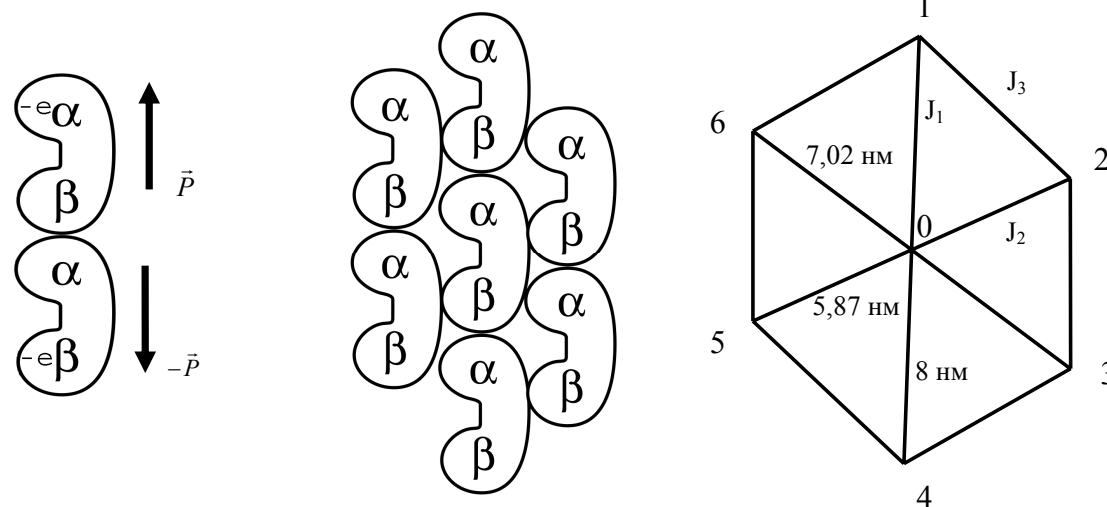


Рис. 1. Схемы: молекулы тубулина в различных конформациях с противоположными дипольными моментами; ближайшего окружения молекулы тубулина; псевдоспиновых связей элементарной ячейки гексагональной решетки микротрубочки цитоскелета

Энергия системы взаимодействующих классических псевдоспинов описывается выражением

$$E = -(1/2) \sum_{i,j}^N J_{ij} S_i^z S_j^z. \quad (1)$$

Не конкретизируя временную динамику взаимодействующих псевдоспинов, будем считать, что в процессе эволюции эта система стремится понизить свою энергию (1), а в пределе $t \rightarrow \infty$ приходит в состояние с минимумом энергии E .

Опираясь на предлагаемую физическую модель конфигурационных степеней свободы микротрубочки цитоскелета как системы взаимодействующих диполей, проведем оценку характерных физических величин и построим диаграмму сегнетоэлектрического состояния микротрубочки при 0 К. Исследования тонкой структуры микротрубочки цитоскелета методом дифракции гамма-лучей показали [5], что молекулы тубулина образуют почти правильную гексагональную решетку, которая показана на рис. 1. Предположим, что каждая молекула тубулина обладает дипольным моментом $p = qd \approx 6,4 \cdot 10^{-28}$ Кл·м, где $q = 1e = 1,6 \cdot 10^{-19}$ Кл (e – заряд электрона) и $d = 4$ нм, чья проекция на вертикальную ось z может быть $+p$ или $-p$. Энергия взаимодействия между двумя элементарными диполями имеет вид [14]:

$$U = (1/4\pi\epsilon\epsilon_0 r_{ij}^3) [p_i p_j - 3(p_i \mathbf{n})(p_j \mathbf{n})] = \\ = (-1/4\pi\epsilon\epsilon_0 r_{ij}^3) [3 \cos^2 \Theta - 1] p^2,$$

где ϵ – диэлектрическая проницаемость среды; $\epsilon_0 \approx 8,85 \cdot 10^{-12}$ Ф/м – диэлектрическая проницаемость вакуума; r_{ij} – расстояние между узлами i, j ; \mathbf{n} – нормированный на единицу вектор, соединяющий узлы i и j ; Θ – угол между направлениями оси диполя (вертикальная ось z) и вектора \mathbf{n} . Для характерных значений этих физических величин ($r_{01} = 8$ нм, $r_{02} = 5,87$ нм, $r_{03} = 7,02$ нм) рассчитаем значения коэффициентов псевдоспиновой связи для ближайших соседей:

$$J_1 = 1,5 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}, \Theta_1 = 0^\circ, J_2 = -2,25 \cdot 10^{-21} \text{ Дж}, \\ \Theta_2 = 60^\circ, \text{ Дж}, \Theta_3 = 120^\circ. \quad (2)$$

Из (2) и рис. 1 видно, что ферромагнитному взаимодействию диполей в парах (0, 1), (1, 2) соответствует $J_1, J_2 > 0$, а антиферромагнитному взаимодействию диполей в паре (0, 2) – $J_2 < 0$. Таким образом, в микротрубочке цитоскелета величины J_{ij} могут различаться по знаку для разных пар дипольных моментов. При этом не всегда геометрия расположения дипольных моментов позволяет ориентировать их дипольные моменты так, чтобы энергия каждой связи $i-j$ была минимальной. Это можно видеть на примере трех дипольных моментов элементарной ячейки микротрубочки цитоскелета. При указанных на рис. 1 знаках коэффициентов связи взаимная ориентация дипольных моментов в вершинах треугольника, например (0, 1), (1, 2), (2, 0), является невыгодной, как бы мы ни ориентировали моменты. Связи, соединяющие дипольные моменты (1, 2), (2, 3), (4, 5), (5, 6), взаимная

ориентация которых не соответствует знаку их констант связи, являются фрустрированными. Наличие фрустрированных связей – важная особенность неупорядоченной дипольной системы микротрубочки цитоскелета. Она приводит к расщеплению основного состояния дипольной системы микротрубочки на большое число низколежащих по энергии состояний.

Сложный характер основного состояния дипольной системы микротрубочки с беспорядочно распределенными псевдоспиновыми связями можно иллюстрировать с помощью численного моделирования сегнетоэлектрического состояния гексагональной решетки псевдоспинов при 0 К. Различные пары дипольных моментов в этой модели взаимодействуют так, что коэффициент связи J_{ij} является случайной функцией. Для простоты, считая $J_1 = J_3$ и выбирая функцию распределения ρ коэффициента связи J_{ij} в виде

$$\rho(J_{ij}) = v\delta(J_{ij} - J_2) + (1-v)\delta(J_{ij} - J_1),$$

где v – концентрация антиферромагнитных псевдоспиновых связей J_2 , $(1-v)$ – концентрация ферромагнитных псевдоспиновых связей J_1 , $\delta(x)$ – дельта функция Дирака, построим фазовую диаграмму сегнетоэлектрического состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета в координатах v, λ , ($\lambda = J_2/J_1$), рис. 2.

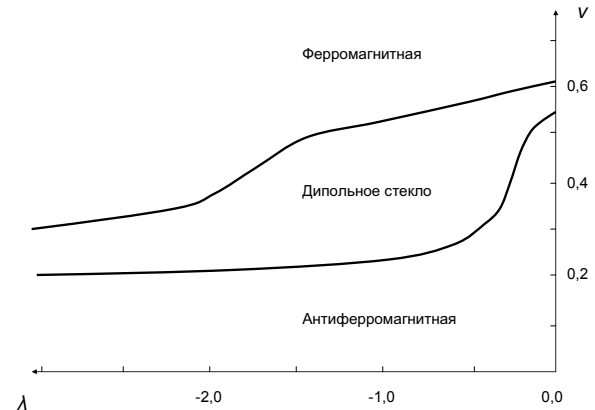


Рис. 2. Фазовая диаграмма сегнетоэлектрического состояния дипольной системы микротрубочки цитоскелета в координатах v, λ

Фазовая диаграмма сегнетоэлектрического состояния микротрубочки цитоскелета при 0 К показывает, что имеются три области: ферромагнитная, антиферромагнитная и дипольное стекло. Для характерных значений параметров микротрубочки цитоскелета ($J_1 = 1,5 \cdot 10^{-21}$ Дж, $J_2 = -2,25 \cdot 10^{-21}$ Дж) концентрация антиферромагнитных псевдоспиновых связей $v = 1/3$, отношение констант связи $\lambda = -1,5$, поэтому из фазовой диаграммы видно, что основное состояние дипольной системы микротрубочки цитоскелета является дипольным стеклом.

Для описания сегнетоэлектрических свойств микротрубочки цитоскелета при условиях $\epsilon_a \sim 0,02$ эВ, $v = 1/3$, $\lambda = -1,5$, средней константы связи $J = 2J_1 + J_2 + J_3 = 0,55 \cdot 10^{-21}$ Дж и основном состоя-

нии – слабый ферромагнетик, сформулируем идеальную модель, в рамках которой, микротрубочка цитоскелета представляет собой цепочку дипольных моментов, каждый из которых взаимодействует только с ближайшими по цепи соседями со средней константы связи J , но не взаимодействует с другими дипольными моментами этой же или других микротрубочек цитоскелета. Для количественного описания сегнетоэлектрических свойств дипольной цепи микротрубочки, введем вектор

$$\mathbf{P} = \sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i,$$

который по определению является дипольным моментом микротрубочки, а \mathbf{p}_i – дипольный момент молекулы тубулина, суммирование по i идет по всем молекулам тубулина. Очевидно, что такая дипольная цепь обладает нулевым средним дипольным моментом

$$\langle \mathbf{P} \rangle = 0,$$

поскольку любое значение вектора \mathbf{P} встречается так же часто, как и противоположное значение $-\mathbf{P}$. Тогда введем величину

$$\langle \mathbf{P}^2 \rangle = \left\langle \left(\sum_{i=1}^N \mathbf{p}_i \right)^2 \right\rangle,$$

которая является средним квадратом дипольного момента микротрубочки, характеристикой сегнетоэлектрических свойств микротрубочки.

В случае, когда направления дипольных моментов молекул тубулина не коррелированы, угол между \mathbf{p}_i и \mathbf{p}_j ($i \neq j$) с равной вероятностью принимает любое значение от 0 до 2π , поэтому получим

$$\begin{aligned} \langle \mathbf{p}_i \mathbf{p}_j \rangle &= p^2 \langle \cos \Theta_{ij} \rangle = 0, \quad p_i^2 = p^2, \\ \langle \mathbf{P}^2 \rangle &= \sum_{i=1}^N \langle p_i^2 \rangle + 2 \sum_{1 \leq i < j \leq N} \langle \mathbf{p}_i \mathbf{p}_j \rangle = Np^2. \end{aligned} \quad (3)$$

Из (3) видно, что среднеквадратический дипольный момент некоррелированной дипольной цепи равен $P = (\langle \mathbf{P}^2 \rangle)^{1/2} = N^{1/2}p$, что для многозвенной цепи гораздо меньше среднеквадратического дипольного момента $P = (\langle \mathbf{P}^2 \rangle)^{1/2} = Np$ цепи с дальной корреляцией.

2. Корреляционная функция дипольных моментов микротрубочки цитоскелета

Для модели дипольной цепи микротрубочки, в которой направления дипольных моментов различных молекул тубулина коррелированы, величина $\langle \mathbf{p}_i \mathbf{p}_j \rangle \neq 0$ для $i \neq j$. Поскольку $\langle \mathbf{p}_i \mathbf{p}_j \rangle \approx \langle \cos \Theta_{ij} \rangle$, количественная мера этой корреляции, определяющая степень упорядочения дипольной цепи микротрубочки, задается средним значением косинуса угла между дипольными моментами цепи.

Введем величину $\langle \cos \Theta(s) \rangle$ – среднее значение косинуса угла между дипольными моментами молекул тубулина, разделенными длиной цепи s . Пусть эта функция от s обладает свойством мульт-

пликативности: если на дипольной цепи есть два соседних отрезка с длинами s и s' , то

$$\langle \cos \Theta(s + s') \rangle = \langle \cos \Theta(s) \rangle \langle \cos \Theta(s') \rangle. \quad (4)$$

Функция, обладающая свойством (4), – это экспонента, т. е.

$$\langle \cos \Theta(s) \rangle = \exp(-s/\tilde{l}). \quad (5)$$

Предэкспоненциальный множитель в (5) равен единице потому, что при $s=0$ должно быть $\langle \cos \Theta(s) \rangle = 1$. \tilde{l} – характерная константа дипольной цепи микротрубочки, которая представляет собой основную количественную характеристику упорядочения дипольных моментов цепи в микротрубочке цитоскелета и называется корреляционной длиной. Корреляция направлений дипольных моментов молекул тубулина экспоненциально убывает с ростом длины цепи между ними. Обсудим физический смысл формулы (4). Рассмотрим сначала угол Θ между двумя близкими по цепи дипольными моментами такими, что длина цепи между ними гораздо меньше корреляционной $s \ll \tilde{l}$, тогда $\langle \cos \Theta(s) \rangle \approx 1$. Это значит, что на участке, коротком по сравнению с корреляционной длиной, дипольные моменты ориентированы в одном направлении. В противоположном предельном случае $s \gg \tilde{l}$, $\langle \cos \Theta(s) \rangle \approx 0$, т. е. память об ориентации дипольных моментов теряется, возникает беспорядок в направлении дипольных моментов молекул тубулина.

Спиралевидная дипольная цепь микротрубочки обладает однородным по всей длине механизмом неупорядоченности, который всегда имеет место, когда тепловые колебания дипольной ориентационные. Вычислим корреляционную длину для дипольной цепи микротрубочки с ориентационным механизмом флуктуаций дипольных моментов цепи, рассмотрим короткий отрезок цепи $s \ll \tilde{l}$ для него согласно (5) $\langle \cos \Theta(s) \rangle \approx 1 - (s/\tilde{l})$. Поскольку угол $\Theta(s)$ мал и $\langle \cos \Theta(s) \rangle \approx 1 - [\Theta^2(s)/2]$, получим $\langle \Theta^2(s) \rangle \approx (2s/\tilde{l})$. Но ориентационные флуктуации дипольных моментов цепи легко описать, используя выражения для энергии такой флуктуации, которая пропорциональна квадрату угла поворота

$$\begin{aligned} \Delta E &= -J \cos \Theta(s) = -J[1 - \Theta^2(s)/2] = \\ &= -J + J\Theta^2(s)/2. \end{aligned}$$

Соответственно средний угол поворота равен

$$\begin{aligned} \langle \Theta^2(s) \rangle &= \frac{2 \int \exp(-\Delta E / k_B T) \Theta^2 d\Theta}{\int \exp(-\Delta E / k_B T) d\Theta} = \\ &= [2k_B T / J](s/r_{02}). \end{aligned} \quad (6)$$

Сравнивая (5) с (6), получим

$$\tilde{l} = [J / k_B T] r_{02}.$$

В модели с фиксированным коэффициентом псевдоспиновой связи J корреляционная длина растет с уменьшением температуры – поскольку ориентационные флуктуации ослабевают. При $T=300$ К, $k_B T = 0,03$ эВ $= 4,8 \cdot 10^{-21}$ Дж, $J = 0,55 \cdot 10^{-21}$ Дж, $r_{02} = 5,87$ нм корреляционная длина $\tilde{l} \approx 0,1 \cdot r_{02} = 0,6$ нм, что много меньше периода дипольной цепи.

3. Дипольный момент микротрубочки цитоскелета

Линейность (одномерность) дипольной цепи микротрубочки ведет к тому, что при отличной от нуля температуре микротрубочка не имеет среднего дипольного момента $\langle P \rangle = 0$, а конфигурация дипольной цепи в любой момент времени является неупорядоченной. Простейшей характеристикой сегнетоэлектрических свойств микротрубочки является среднеквадратический дипольный момент $P = (\langle P^2 \rangle)^{1/2}$. Сравнение его с величиной среднего дипольного момента полностью упорядоченной цепочки характеризует степень разупорядоченности дипольной цепи.

Любую длинную дипольную цепочку можно представить как совокупность некоррелированных между собой сегментов длиной l , состоящих из (l/b) полностью упорядоченных дипольных моментов p . Среднеквадратичный дипольный момент длинной идеальной дипольной цепи пропорционален корню из ее длины. Простую оценку среднеквадратичного дипольного момента микротрубочки можно получить из того факта, что память о направлении дипольных моментов при любом механизме флуктуаций простирается вдоль цепи лишь на конечное расстояние порядка корреляционной длины \tilde{l} . Действительно, сегменты дипольной цепи микротрубочки длиной порядка \tilde{l} можно считать практически полностью упорядоченными – в том смысле, что величина дипольного момента для каждого сегмента равна $p(\tilde{l}/b)$. Число таких сегментов в дипольной цепи микротрубочки $N_{\tilde{l}} \approx L/\tilde{l}$, где L – контурная длина дипольной цепи микротрубочки. Поскольку по направлениям дипольные моменты таких сегментов практически независимы, то средний квадрат дипольного момента всей микротрубочки цитоскелета можно оценить с помощью (3):

$$\langle P^2 \rangle \approx (L/\tilde{l}) p^2 (\tilde{l}/b)^2. \quad (7)$$

Пропорциональность $\langle P^2 \rangle$ контурной длине дипольной цепи – важнейшее фундаментальное свойство микротрубочки цитоскелета. Иначе его можно выразить оценкой $P \approx N^{1/2}$, где N – число дипольных моментов молекул тубулина в микротрубочке. Отметим, что соотношение (7) получено путем оценки и числовой коэффициент в нем остался неопределенным. Можно ожидать, что он зависит от структуры дипольной цепи микротрубочки, конкретно – от механизма флуктуаций дипольных моментов.

Хотя экспериментально можно измерить среднеквадратичный дипольный момент микротрубочки $P = (\langle P^2 \rangle)^{1/2}$ и контурную длину дипольной цепи микротрубочки L , но не зная числового фактора в формуле (7), определить из нее корреляционную длину нельзя. Поэтому целесообразно ввести другую количественную характеристику неупорядоченности дипольной цепи микротрубочки, непосредственно связанную с величиной $(\langle P^2 \rangle)^{1/2}$, которая называется эффективным сегментом. Длина эффективного сегмента \tilde{l} для длинной $L \gg \tilde{l}$ дипольной цепи микротрубочки определяется соотношением

$$\langle P^2 \rangle \approx (L/\tilde{l}) p^2 (\tilde{l}/b)^2 = p^2 (L\tilde{l}/b^2). \quad (8)$$

Из (8) следует, что при представлении реальной дипольной цепи микротрубочки в виде дипольной цепи из $N_{\tilde{l}} = L/\tilde{l}$ некоррелированных между собой эффективных сегментов получается количественно точный результат для $\langle P^2 \rangle$ (в отличие от представления в виде последовательности корреляционных длин, которое верно лишь по порядку величины). Сравнивая (7) и (8), видно, что параметры l и \tilde{l} имеют один и тот же порядок величины и потому оба могут быть использованы как характеристики степени упорядоченности дипольной цепи микротрубочки.

Таким образом, в том, что касается среднеквадратичного дипольного момента микротрубочки, задача микроскопической теории сводится к вычислению эффективного сегмента для каждого конкретного механизма флуктуаций дипольных моментов. Начнем с модели с ориентационным механизмом флуктуаций дипольных моментов микротрубочки. Пусть конфигурация дипольной цепи микротрубочки длины L задается полем вектора $(1/b)p(s)$ – плотностью дипольного момента сегмента цепи, находящегося на расстоянии s вдоль контура цепи от ее начала. Дипольный момент микротрубочки P можно записать в виде

$$P = (1/b) \int_0^L p(s) ds.$$

Для дипольной цепи микротрубочки, состоящей из дискретных сегментов, эта общая формула превращается в свой дискретный аналог (1). Используя формулы (3, 5), вычислим:

$$\begin{aligned} \langle P^2 \rangle &= (1/b)^2 \int_0^L ds \int_0^L ds' \langle p(s)p(s') \rangle = \\ &= (1/b)^2 \int_0^L ds \int_0^{L-s} dt \langle \cos \Theta(t) \rangle = \\ &= 2p^2 (\tilde{l}/b)^2 [(L/\tilde{l}) - 1] + \exp(-L/\tilde{l})]. \end{aligned} \quad (8)$$

где $t = s' - s$. Формула (8) определяет среднеквадратичный дипольный момент цепи микротрубочки произвольной длины. Для анализа (8), рассмотрим два противоположных предельных случая – короткую ($L \ll \tilde{l}$) и очень длинную ($L \gg \tilde{l}$) дипольные цепи микротрубочки. Имеем

$$\begin{aligned} \langle P^2 \rangle &\approx p^2 (L/b)^2 \text{ для } L \ll \tilde{l}, \\ \langle P^2 \rangle &\approx p^2 (L\tilde{l}/b^2) \text{ для } L \gg \tilde{l}. \end{aligned}$$

Первое равенство означает, что короткая дипольная цепь микротрубочки практически полностью упорядочена и среднеквадратичный дипольный момент цепи пропорционален контурной длине $P \approx L$. Второе же равенство точно соответствует оценке (7) и показывает, что эффективный сегмент для модели с ориентационным механизмом флуктуаций вдвое превышает корреляционную длину $\tilde{l} = 2\tilde{l}$.

Фактор 2 в этом соотношении можно интерпретировать как проявление того факта, что память об ориентации дипольных моментов распространяется в двух направлениях вдоль цепи.

4. Обсуждение результатов и выводы

При исследовании физической модели конфигурационных степеней свободы микротрубочки цитоскелета как системы взаимодействующих диполей получены следующие результаты и выводы:

1. В микротрубочке цитоскелета величины констант связи J_{ij} могут различаться по знаку для разных пар дипольных моментов. Геометрия расположения дипольных моментов не всегда позволяет ориентировать их так, чтобы энергия каждой связи $i-j$ была минимальной. Связи, соединяющие дипольные моменты, взаимная ориентация которых не соответствует знаку констант связи, являются фрустрированными. Наличие фрустрированных связей – важная особенность неупорядоченной дипольной системы микротрубочки цитоскелета.
2. На фазовой диаграмме сегнетоэлектрического состояния микротрубочки цитоскелета при 0 К имеются три области: ферромагнитная, антиферромагнитная и дипольное стекло. Для характерных значений параметров микротрубочки цитоскелета (концентрация антиферромагнитных псевдоспиновых связей $\nu=1/3$, отношение констант связи $\lambda=-1,5$) основное состояние дипольной системы микротрубочки цитоскелета является дипольным стеклом или слабым ферромагнетиком.
3. Линейность (одномерность) дипольной цепи микротрубочки цитоскелета ведет к тому, что при температуре отличной от нуля микротрубочка никогда не имеет среднего дипольного момента $\langle P \rangle = 0$, а конфигурация дипольной цепи в любой момент времени является неупорядоченной. Простейшая характеристика сегнетоэлектрических свойств микротрубочки – среднеквадратический дипольный момент $P = (\langle P^2 \rangle)^{1/2}$, который для некоррелированной

дипольной цепи равен $P = (\langle P^2 \rangle)^{1/2} = N^{1/2} p$. Для многозвенной цепи $P < Np$ полностью упорядоченной дипольной цепи.

4. Среди множества конфигураций, через которые дипольная цепь микротрубочки проходит в процессе теплового движения, число конфигурации с дальним порядком дипольной цепи мало. Термодинамическому равновесию идеальной дипольной цепи, т. е. максимуму энтропии отвечает полностью неупорядоченное состояние. Дипольная цепь микротрубочки будет находиться в неупорядоченном состоянии, и причина этого заключена в большой ее длине.
5. Даже малые ориентационные флуктуации дипольных моментов разных участков дипольной цепи приводят к полному разупорядочению дипольной цепи микротрубочки. Отсюда следует, что неупорядоченность дипольной цепи микротрубочки – фундаментальное свойство длинных дипольных цепей, обусловленное ее линейным строением.
6. Существует характерная константа \tilde{l} для дипольной цепи микротрубочки (корреляционная длина) – основная количественная характеристика порядка дипольных моментов. Корреляция направлений дипольных моментов молекул тубулина экспоненциально убывает с ростом длины межмолекулярной цепи. Следовательно, ориентационные флуктуации дипольной цепи приводят к практически полной независимости направлений дипольных моментов, разделенных длиной, превышающей корреляционную. Для ориентационного механизма флуктуаций корреляционная длина зависит от константы псевдоспиновой связи J , температуры T , периода дипольной цепи r_{02} и равна $\tilde{l} = [J/k_B T] r_{02}$. При $T=300$ К, $k_B T=0,03$ эВ $=4,8 \cdot 10^{-21}$ Дж, $J=0,55 \cdot 10^{-21}$ Дж, $r_{02}=5,87$ нм корреляционная длина $\tilde{l} \approx 0,1 r_{02} = 0,6$ нм, что много меньше периода дипольной цепи.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Пенроуз Р. Тени разума: в поисках науки о сознании. – Ижевск: ИКИ, 2005. – 690 с.
2. Hameroff S., Penrose R. Orchestrated Reduction of Quantum Coherence in Brain Microtubules // Journal of Consciousness Studies. – 1994. – № 1. – P. 91–118.
3. Кайманович В.А., Крупицкий Е.М., Спириков А.В. Возможная роль внутриклеточных электрических полей в ориентации сборки микротрубочек // Биофизика. – 1990. – Т. 35. – № 4. – С. 603–604.
4. Broun J.A., Tuszynski J.A. A Review of the Ferroelectric Model of Microtubules // Ferroelectrics. – 1999. – V. 220. – P. 141–155.
5. Tuszynski J.A., Hameroff S.H., Sataric M.V., Trpisova B.T., Nip M.L. Ferroelectric behavior in microtubule dipole lattices // J. Theor. Biol. – 1995. – V. 174. – P. 371–380.
6. Hunt C., Stebbings H. Role of MAPs and motors in the bundling // Cell Motility and the Cytoskeleton. – 1994. – V. 27. – P. 6978–6985.
7. Благодатских В.И., Гаряев П.П., Маслов М.Ю., Решетняк С.А., Щеглов В.А. Взаимодействие когерентного электромагнитного излучения с биомакромолекулами // Laser Physics. – 1996. – V. 6. – № 4. – P. 621–653.
8. Sataric M.V., Tuszynski J.A., Zakula R.B. Kinklike excitations as an energy transfer mechanism in microtubules // Phys. Rev. E. – 1993. – V. 48. – № 1. – P. 589–597.
9. Паташинский А.З., Покровский В.Л. Флуктуационная теория фазовых переходов. – М.: Наука, 1982. – 323 с.
10. Слядников Е.Е. Микроскопическая модель информационной биомакромолекулы // Письма в ЖТФ. – 2006. – Т. 32. – N. 8. – С. 52–59.
11. Слядников Е.Е. Предпереходное состояние и структурный переход в деформированном кристалле // Физика твердого тела. – 2004. – Т. 46. – N. 6. – С. 1065–1071.
12. Волькенштейн М.В. Биофизика. – М.: Наука, 1988. – 591 с.
13. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Квантовая механика. – М.: Наука, 1989. – 521 с.
14. Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Электродинамика сплошных сред. – М.: Физматлит, 2003. – 656 с.

Поступила 22.09.2006 г.